

Rozkład gęstości elektronowej

$|\Psi(\vec{r}_1, m_{s1}, \dots, \vec{r}_N, m_{sN})|^2$ jest prawdopodobieństwem znalezienia elektronu "1" ze spinem m_{s1} w otoczeniu punktu \vec{r}_1 , elektronu "2"

Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w otoczeniu punktu \vec{r} bez względu na to gdzie znajdują się pozostałe elektrony

$$\sum_{\substack{\text{wszystkie} \\ m_s}} \int \dots \int |\Psi(\vec{r}, m_{s1}, \vec{r}_2, m_{s2}, \dots, \vec{r}_N, m_{sN})|^2 d^3r_2 \dots d^3r_N$$

Podobnie gdybyśmy wybrali sobie drugi elektron, etc.

Całkowity rozkład gęstości elektronowej

$$n(\vec{r}) = N \sum_{m_{s1} \dots m_{sN}} \int \dots \int |\Psi|^2 d^3r_2 \dots d^3r_N$$

Potencjał elektrostatyczny (mikroskopowy!)

$$\Delta \varphi = -4\pi n(\vec{r})$$

Równanie Poissona

H₂O



Number of centers: 3

Total charge: 0.0000

Nr	Name	AN	Coordinates x,y,z [A]:			Charge
1	O	8	0.0000	0.0000	0.1749	-0.6567
2	H	1	0.0000	0.7751	0.7833	0.3284
3	H	1	0.0000	-0.7751	0.7833	0.3284

OH

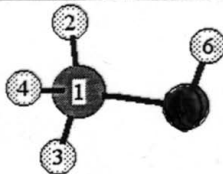


Number of centers: 2

Total charge: -1.0000

Nr	Name	AN	Coordinates x,y,z [A]:			Charge
1	O	8	0.0000	0.0000	0.1749	-0.9702
2	H	1	0.0000	0.7751	0.7833	-0.0298

CH₃OH



Number of centers: 6

Total charge: 0.0000

Nr	Name	AN	Coordinates x,y,z [A]:			Charge
1	C	6	4.0229	0.6939	-8.6146	0.1479
2	H	1	4.0099	1.8031	-8.6448	-0.0088
3	H	1	3.7547	0.3243	-9.6175	0.0664
4	H	1	3.2499	0.3386	-7.9020	-0.0088
5	O	8	5.3075	0.1799	-8.3127	-0.5500
6	H	1	5.5484	0.5090	-7.4182	0.3532

- Potencjał pola elektrostatycznego wokół polimerów (DNA, białek) znajdujących się w roztworze elektrolitu.

Z różniczkowej postaci prawa Gaussa mamy:

$$-\nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi) = \rho + e n_+ - e n_-$$

$$n_{\pm} = n \exp(-U_{\pm}/kT)$$

$$\text{gdzie } U_{\pm} = e\phi$$

Stąd równanie Poissona - Boltzmanna:

$$-\nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi) = \rho - 2en \sinh(e\phi/kT)$$

- Również zastosowanie w dynamice Brownowskiej.

AMERICAN
ASSOCIATION FOR THE
ADVANCEMENT OF
SCIENCE

SCIENCE

4 MARCH 1994
VOL. 263 • PAGES 1193-1344

\$6.00

